

# 水中自然超空泡机理及减阻效应的 非平衡分子动力学研究\*

龚博致 张秉坚†

(浙江大学化学系 杭州 310027)

(2008 年 7 月 29 日收到 2008 年 8 月 14 日收到修改稿)

应用非平衡分子动力学方法,对水中超空泡流形成机理及减阻效应进行了模拟研究.计算得到了流体密度分布、局部空化数分布、阻力系数及含气百分比等流场细节数据.结果显示空化数判据在分子层面仍然成立.局部低空化数区域与超空泡形成区域在空间上分离.超空泡形成和稳定主要受物体运动速度影响.空化器构型对空泡内含气率有较大影响.从云雾空化状态过渡到超空泡,物体表面摩擦力可以减小 50%—90%.与数值模拟结果的对比表明非平衡分子动力学模拟适用于研究微观超空泡机理,能够经济有效地探讨超高速流体运动的一些自然规律.

关键词:非平衡分子动力学,超空泡,高速流体,摩擦系数

PACC:0570,4755B,4770

## 1. 引 言

自从俄罗斯“暴风”超空泡鱼雷导弹利用超空泡原理大幅度降低水中阻力,使速度达到 200 节以上后,水中航行体超空泡减阻技术研究受到了广泛关注.德、俄、美、乌克兰等国<sup>[1,2]</sup>的研究表明,利用超空泡技术可以使水下物体完全包含在空泡内,仅头部与水体接触,从而减少 90% 以上的表面摩擦.

由于超空泡实验装置耗资巨大,数值计算和模拟成为最重要的研究手段之一.在数值计算方面,对空泡流现象的两种认识发展出两类主要的数值计算方法,即边界元数值计算方法(boundary element method, BEM)和多相流方法(multi-phase flow method).用边界元型方法求解流场可追溯到 Rankine<sup>[3]</sup>的工作.后 Kinnas 等<sup>[4]</sup>应用 Green 定理和低阶边界元法来处理二维和三维局部空泡及超空泡水翼绕流. Nishiyama<sup>[5,6]</sup>和 Semenenko 等<sup>[7-9]</sup>采用奇异积分-差分方程的方法,将势流理论应用到求解非定常问题. Kunz 等<sup>[10]</sup>发展了多相流人工压缩性方法,他们提出非守恒的连续性方程,用于模拟不同壁面结构的流动状态.模拟结果与实验基本符合.傅慧萍等<sup>[11,12]</sup>利用 FLUENT 6.0 对不同头形的回转体空

泡流的几何特性、局部空泡阻力特性以及超空泡减阻特性进行了研究.贾力平等<sup>[13,14]</sup>对锥头的人工通气超空化流动问题以及空化器线型与超空泡减阻效果进行了数值计算.这些计算主要基于流体力学,但流体力学难以涉及新相形成、微界面稳定性和多相流变化等更细节的机理问题.超空泡现象从分子层面讲是流体分子受速度场影响形成汽液两相的过程以及相界面的动态平衡问题,理论上可以用非平衡分子动力学方法来研究.但是到目前为止,还没有看到相关研究的报道.

非平衡分子动力学(non-equilibrium molecular dynamics, NEMD)模拟已经应用于许多重要科学领域,与分子流动有关的如:Travis 和 Gubbins<sup>[15]</sup>用 NEMD 方法观察到通过狭缝的流体在流动方向上的密度摆动波,并定量统计了其波长等参数.其模拟结果显示,当流体尺度小于 5 个流体分子直径时, Navier-Stokes 方程计算结果开始偏离实际值. NEMD 方法在描述流体微观层面的流动细节方面相当精确,正好可以弥补数值模拟的不足.高向阳等<sup>[16]</sup>利用分子动力学模拟研究了电流变阀门装置中的泊肃叶流,得到了压力梯度、体积流率等流动数据,观察并研究“呼吸式”跃迁流动现象的规律. Wang 等<sup>[17]</sup>模拟了纳米管道中  $N_2$  和  $H_2$  混合气体的流动,发现

\* 国家自然科学基金(批准号 20671080 和 20473073)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: Zbj@mail.hz.zj.cn

在这种条件下气体密度可以急剧增大,同时仍保持气态的各种物化性质。

本文在我们前期工作<sup>[18-21]</sup>的基础上,运用 NEMD 模拟方法,研究了开放体系水中超空泡的形成过程、流体粒子分布规律、状态性质、界面现象和摩擦情况等,并与文献数值模拟的结果进行了比较,为实际超空泡技术的理论研究提供了新的方法和微观层面的数据。

## 2. 模拟模型与方法

### 2.1. NEMD 模拟细节

模拟中流体水分子模型采用 SPC/E 模型<sup>[22]</sup>,势能表达式类似于 Lennard-Jones 势能

$$\phi = -\left(\frac{A}{r_{ij}}\right)^6 + \left(\frac{B}{r_{ij}}\right)^{12}, \quad (1)$$

其中  $\phi$  为粒子间相互作用势能,  $r_{ij}$  为  $i$  和  $j$  粒子间的距离,模型参数根据文献值  $A = 0.37122(\text{kJ/mol})^{1/6} \cdot \text{nm}$ ,  $B = 0.3428(\text{kJ/mol})^{1/12} \cdot \text{nm}$ . 氢原子电荷分布  $q_{\text{H}} = 0.4238 e$ , 氧原子电荷分布  $q_{\text{O}} = 0.8476 e$ , 对应偶极矩为  $2.35\delta_{\text{H}_2\text{O}}$ . 计算中水分子势能参数均采用文献值<sup>[23]</sup>:  $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}/k_{\text{B}} = 78.223 \text{ K}$ ,  $\delta_{\text{H}_2\text{O}} = 0.317 \text{ nm}$ .

为处理静电力在长程作用上的截断误差,本工作中采用计算较为简便的反应场法<sup>[24]</sup>,其势能表达式为

$$\phi_{\text{react}}^{\text{ES}}(r_{ij}) = 4\pi\epsilon_{\text{H}_2\text{O}} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \left[ 1 - \left( \frac{r_{ij}}{r_c} \right)^\theta \right] \times \frac{|r_{ij}|}{r_{ij}} \theta (r_c - R), \quad (2)$$

其中  $\theta$  为单位步进函数,  $q_i$  为  $i$  粒子上的电荷分布,  $r_c$  为静电力截断半径,一般取  $r_c = 3.5\delta_{\text{H}_2\text{O}}$ .

为了使流动体系的模拟更符合真实情况,体系应用 NEMD 开放系统模型,模型设置如图 1 所示。

该模型通过双系统耦合得到:其一是宏量平衡流体,使用平衡分子动力学模拟(EMD)技术描述;其二是包含固体阻碍物的非平衡流体空间,使用 NEMD 模拟方法描述.耦合模型以 EMD 体系为背景,在各个方向上应用周期边界条件,模拟宏量水分子,如图中阴影部分所示;耦合模型的 NEMD 体系,如图中含有固体空化器的非阴影部分所示,用于考察空泡流现象.NEMD 体系以恒定速度  $U$  沿  $x$  轴方向相对于 EMD 体系移动,不计算周期边界条件.在

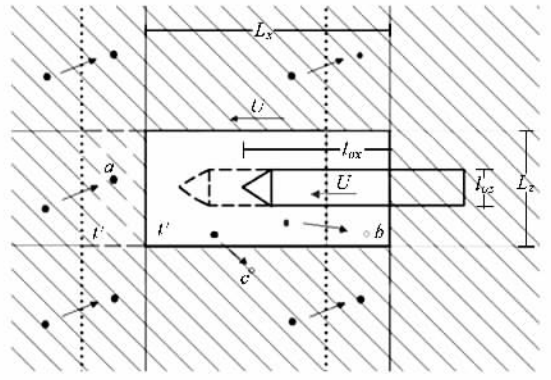


图 1 开放体系非平衡分子动力学模拟模型

统计 NEMD 体系中粒子的位置和相互作用力时,同时计算周围 EMD 体系的映像.当从  $t$  时刻变到  $t'$  时刻(图中虚线位置),分别判断两个体系内粒子是否超出边界.当 EMD 体系粒子跨越中央元胞在  $t'$  时刻的边界时,在 EMD 系统内应用周期边界条件,同时将该粒子复制到 NEMD 系统内(如粒子  $a$ );当 NEMD 体系粒子跨越 NEMD 体系边界时,粒子将被删除并不再移入 EMD 体系(如粒子  $b$  和  $c$ ).

流体模拟中温度控制采用 Nose-Hoover<sup>[25]</sup>提出的热浴法.固体表面使用硅酸盐晶体结构,并应用 Todd 等<sup>[26]</sup>提出的基于高斯最小限制规则(Gauss's principle of least constrain)的控制算法.该算法可以保证每层粒子平均质心位置在  $z$  坐标轴上保持稳定,不受 NEMD 模拟中流体作用力的影响而变形。

模拟程序使用 Visual C++ 6.0 编写,为了计算方便和提高计算精度,主要物理量使用约化单位表示,如表 1.

表 1 物理量约化单位

物理量	单位
温度 $T^*$	$\epsilon/k_{\text{B}}$
时间 $t^*$	$(m\delta^2/\epsilon)^{1/2}$
作用力 $F^*$	$\epsilon/\delta$
长度 $l^*$	$\delta$
速度 $v^*$	$(\epsilon/m)^{1/2}$
密度 $\rho^*$	$m/\delta^3$
压力 $P^*$	$\epsilon/\delta^3$

### 2.2. 流体性质统计理论

空化数  $\sigma$  是判断空泡流产生的一个重要参数.在固定雷诺数和接触角的情况下,不同  $\sigma$  的空泡流存在多种形态,从云雾空化(cloud cavitation)到片空化(sheet cavitation)到超空泡(super-cavitation).其中超空

泡现象是空泡流的最终形态,它可以产生稳定而明晰的汽液界面.

空化数的定义如下:

$$\sigma = \frac{p_\infty - p_c}{0.5\rho U_\infty^2}, \quad (3)$$

其中  $p_\infty$  和  $U_\infty$  是无穷远处流体的压力和流体与空化器之间的相对运动速度,  $p_c$  为空泡内压力,  $\rho$  为液体密度.

计算  $\sigma$  所需的压力值可通过 Irving-Kirkwood 公式的近似形式 IKI<sup>[27]</sup>求得

$$P_d = \frac{1}{V_{bin}} \left[ \sum_i [v_{id} - u_d \mathbf{I} v_{id} - u_d] + \frac{1}{2} \sum_j r_{ij}(d) F_{ij}(d) \right], \quad (4)$$

其中  $v_{id}$  为  $i$  粒子在  $d$  方向上的速度分量,  $u_d$  为局部流体在  $d$  方向上的平均流速分量.  $F_{ij}(d)$  和  $r_{ij}(d)$  分别表示  $i$  和  $j$  粒子相互作用力和距离在  $d$  方向上的分量.

为研究空化现象产生过程和  $\sigma$  在流场中的分布,本工作根据 Pellone 等<sup>[27]</sup>修改的 Logvinovich 独立法则(Logvinovich independent principle)模型.该法则假设空泡流中超空泡各截面上的气泡界面发展是相互独立的,其主要控制因素为截面上压力和  $p_\infty$  之间的差值,即  $\sigma$ . 基于这一假设,模拟体系可以被划分为多个小方格,各个方格可以被看成独立的空泡区间.在区间内可以计算各自的局部空化数  $\sigma_l$ , 定义如下:

$$\sigma_l = \frac{p_\infty - p_l}{0.5\rho U_\infty^2}, \quad (5)$$

其中  $p_l$  为方格内的局部压力.

超空泡减阻效果是本工作研究的重点,物体侧表面的摩擦系数  $C_f$  定义如下:

$$C_f = \frac{\tau_w}{1/2\rho U_\infty^2}, \quad (6)$$

其中  $\tau_w$  为物体侧面受到的张力.

各统计方格中流体密度低于气相密度的概率被定义为局部气相体积百分比  $\alpha_{vbin}$ , 即

$$\alpha_{vbin} = \frac{t_g}{T} \times 100\%, \quad (7)$$

其中  $t_g$  为方格中局部密度处于局部压力  $p_l$  所对应临界密度以下的时间步数;  $T$  为总的统计时间步数.

$\alpha_{vbin}$  的最大值  $\alpha_{vmax}$  可以认为是近壁区间空泡内的气

相体积百分比,该值常被用于判断超空泡的优良率.

### 3. 模拟结果与讨论

在所有模拟中,温度恒定在 300 K 左右,水分子初始密度  $\rho_0 = 997 \text{ kg/m}^3$ , 模拟体系尺度各方向约化参数  $L_x^* = 15, L_y^* = 6, L_z^* = 12$ , 模拟粒子数  $N = 4000\text{--}4200$ . 时间步长选取为  $\Delta t^* = 0.006$ . 在统计  $\sigma_l$  及  $\rho$  的分布图时,将模拟空间分割成体积  $V_{bin} = L_y^* \Delta x^* \Delta z^*$  的网格,其中网格间距  $\Delta x^* = \Delta z^* = 0.5$ . 模拟体系弛豫时间 10000 步,后收集 30000 步数据以统计平均求热力学性质.

#### 3.1. 三角形空化器超空泡流模拟

三角形是常见水下航行体头部模型.为研究三角形空化器在不同  $U_\infty$  条件下对空泡流形成的影响,本工作模拟了物体运动速度分别为  $U_\infty^* = 3, 6, 12$  (约 80 m/s, 150 m/s, 220 m/s) 条件下的空泡流.水中物体模型尺度约化参数  $l_{ox}^* = 12.5, l_{oz}^* = 5$ , 空化器头部为正三角形.

结果如图 2 所示,在  $U_\infty^* = 6$  和  $U_\infty^* = 12$  条件

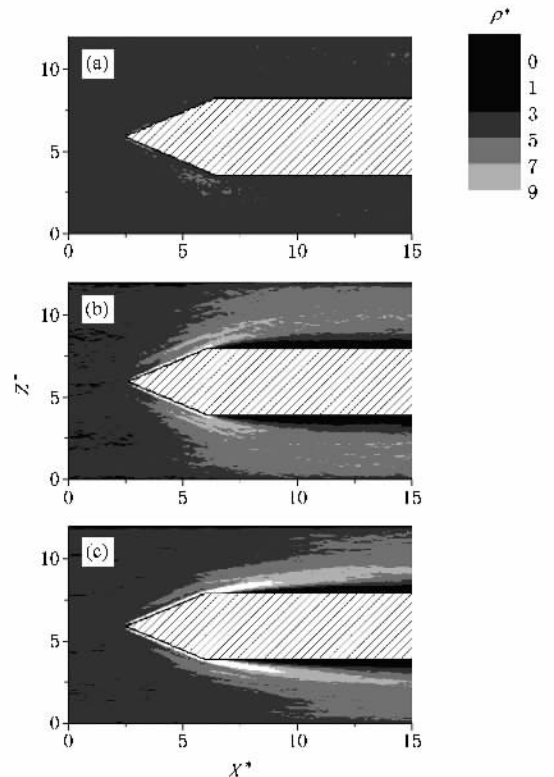


图 2 三角形空化器模拟的局部密度分布图 (a)  $U_\infty^* = 3$ ; (b)  $U_\infty^* = 6$  (c)  $U_\infty^* = 12$

下,流体在水下物体壁面附近形成了密度接近 0 的区域,可以认为生成了稳定且包裹整个水下物体的气相空泡.随着  $U_\infty$  的上升,汽液相间密度差也随之增大,产生稳定而明确的超空泡界面.

三种运动速度下的流场空化数值可由(3)式计算得到,分别为(a) $\sigma = 0.362$  (b) $\sigma = 0.174$  (c) $\sigma = 0.107$ ,表明当  $U_\infty^* > 6$  时,流体空化数接近空泡流的临界值 0.1,有利于超空泡现象的产生.其  $\sigma_l$  分布图如图 3 所示.

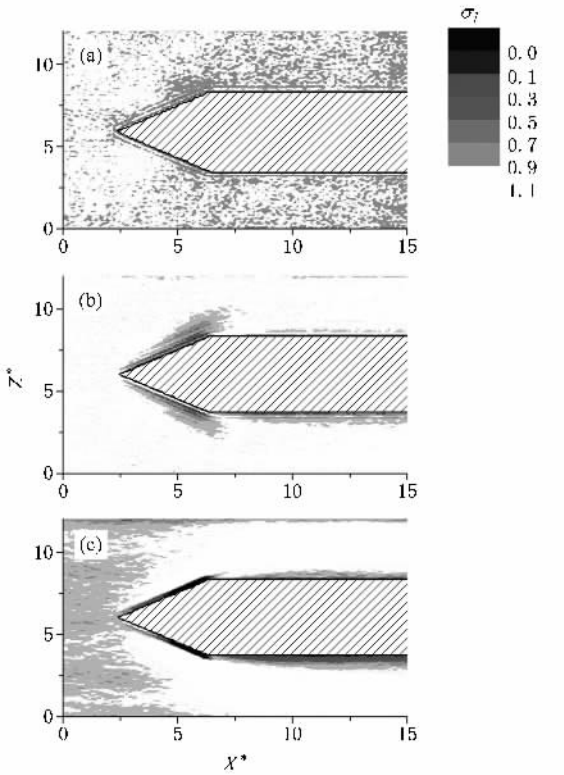


图 3 三角形空化器模拟的局部空化数分布图 (a) $U_\infty^* = 3$  (b) $U_\infty^* = 6$  (c) $U_\infty^* = 12$

随着相对运动速度的上升,空化器附近的低  $\sigma_l$  区域越明显.其中主要的低  $\sigma_l$  区域仍然集中在空化器头部两侧,位于实际超空泡区域的前端,说明空化器表面形状的不连续所带来的湍流是引发超空泡现象的诱因.

### 3.2. 不同空化器形态对超空泡的影响

为研究不同空化器对超空泡形成过程中的影响,本工作还模拟了平头空化器与半圆头空化器.平头空化器  $l_{oz}^* = 6$ ,全长  $l_{ox}^* = 12.5$ ;半圆头空化器  $l_{oz}^* = 5$ ,全长  $l_{ox}^* = 12.5$ .水分子与物体相对运动速度均

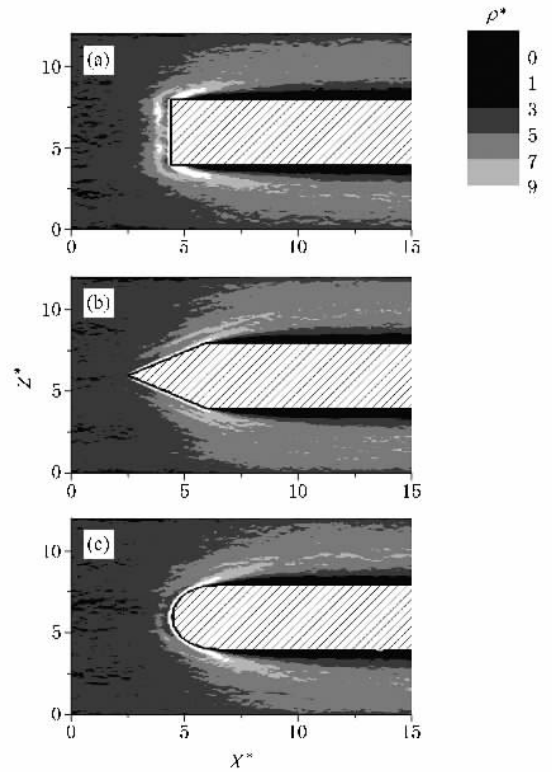


图 4 不同空化器形态下  $U_\infty^* = 6$  时的局部密度分布图 (a)平头空化器 (b)三角形空化器 (c)半圆头空化器

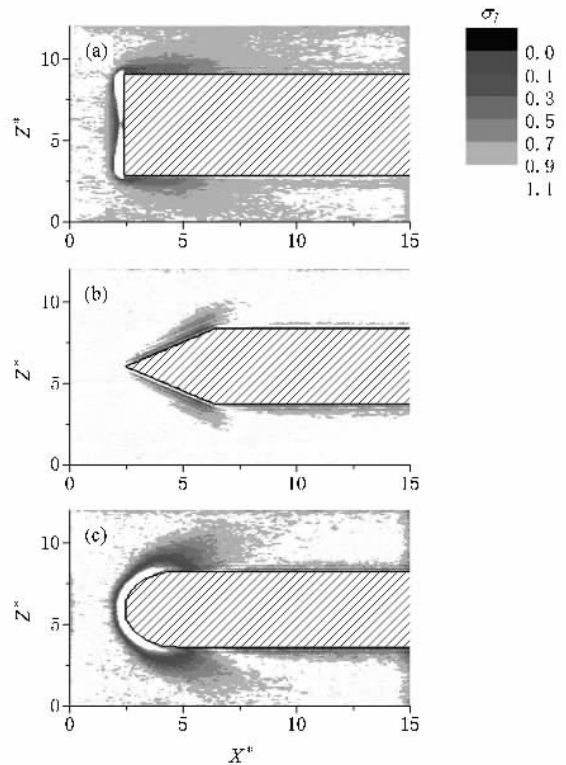


图 5 不同空化器形态下  $U_\infty^* = 6$  时的局部空化数分布图 (a)平头空化器 (b)三角形空化器 (c)半圆头空化器

取  $U_{\infty}^* = 6$ . 模拟结果与三角形空化器的对比如图 4 和图 5.

在  $U_{\infty}^* = 6$  条件下, 三种空化器都能形成稳定的超空泡, 其流场空化数为 (a)  $\sigma = 0.127$  (b)  $\sigma = 0.174$  (c)  $\sigma = 0.113$ .  $\sigma_l$  的分布如图 5 所示, 半圆头空化器形成的低  $\sigma_l$  区域较为分散, 且沿物体表面分布, 平头空化器仅在空化器前端产生紧密的低  $\sigma_l$  区域, 其超空泡形态与另外两种空化器类似, 但整体  $\sigma$  较另外两种空化器低, 说明尽管平头空化器受到更大的正面阻力, 但也更容易形成空泡, 从而使降低壁面摩擦阻力的目标更易于实现. 由此可以看到, 通过合理地设计空化器构形, 有可能使空泡的减阻作用抵消或超过其正面阻力, 从整体上降低水下航行体受到的阻力.

### 3.3. 减阻效果比较

本工作得到的不同模拟条件下体系的超空泡参数和相关计算结果见表 2, 包括流场空化数、局部气相体积百分比和摩擦系数, 表中同时列出了类似  $\sigma$  条件下宏量数值模拟得到的空泡流减阻数据, 即文献摩擦系数  $C_{\text{flit}}^{[14]}$ .

表 2 不同模拟条件下超空泡参数对比

水中物体	$U_{\infty}^*$	$\sigma$	$a_{\text{vmax}}/\%$	$C_f/10^{-4}$	$C_{\text{flit}}^{[14]}$
三角形空化器	3	0.362	8	22.33	$29.23 \times 10^{-4}$
三角形空化器	6	0.174	56	15.45	$12.98 \times 10^{-4}$
三角形空化器	12	0.107	87	3.73	$2.33 \times 10^{-4}$
半圆头空化器	6	0.127	73	6.53	N/A
平头空化器	6	0.113	89	2.26	$1.40 \times 10^{-4}$

由表 2 可看出,  $U_{\infty}$  是水下航行体产生超空泡流的最重要因素, 空化现象的  $\sigma$  判据不仅适用于宏量流体, 也在一定程度上适用于分子层面的流体空化现象的研究. 当  $\sigma$  接近 0.1 时, 航行体表面空化现象从云雾空化过渡到超空泡, 可以降低物体壁面上 50%—90% 的表面摩擦. 空化器头部外形对空泡内

含气百分比有着较大影响, 平头空化器可以在  $\sigma$  相近的情况下产生含气百分比较高的空泡, 从而进一步降低表面摩擦力. 由本工作得到的摩擦力数据与宏量流体数值模拟得到的结果一致, 说明本工作所采用的模型适用于研究微观超空泡机理, 能够将宏观状态下的流动现象与统计热力学理论结合起来, 为研究超空泡的形成机理和设计超空泡提供了新的工具.

## 4. 结 论

本工作在构筑开放系统流动模型的基础上, 运用 NEMD 模拟方法研究了水中高速物体的空泡流现象和减阻效应, 得到了以下结论:

1. 对不同条件下超空泡流动的模拟结果表明, 本工作构筑的 NEMD 开放系统模型适用于研究微观超空泡的机理, 能够从该模型模拟得到高速流动中的流场细节数据, 并观察流动现象在分子尺度上的行为, 将微观状态下的流动现象与统计热力学理论结合起来;

2. 模拟得到了不同条件下超空泡的产生和发展. 发现  $\sigma < 0.1$  的判据在分子尺度上仍然成立,  $\sigma_l < 0.1$  的区域是超空泡的起源, 该区域在空间上与空泡区域并不重叠. 在  $\sigma$  接近的条件下, 平头空化器比三角形和半圆头空化器更容易产生超空泡, 其空泡内部气体百分比也相对较高, 因此有利于超空泡的实现和壁面减阻. 在移动速度相同的情况下, 通过优化空化器外形设计, 可以降低运行物体 50%—90% 的表面摩擦. 这些结果对于超空泡应用技术的研究有着重要的启示意义.

3. 模拟观察到的分子尺度上的流动现象和预测的相关数据, 如摩擦系数和流场空化数等, 也基本符合宏量流体数值模拟的规律. 这表明 NEMD 模拟体系和理论可以进一步外推到更大尺度范围的模拟, 同时说明本工作的研究方法有可能成为研究和设计水下高速航行体的一种新的工具.

[1] Chen Y, Heister S D 1998 *J. Fluids Eng.* **116** 613

[2] Vlasenko Y D 2001 *International Journal of Fluid Mechanism Research* **28** 717

[3] Rankine W J 1871 *Phil. Trans.* **161** 267

[4] Kinnas S A, Fine N E 1993 *J. Fluid Mech.* **254** 151

[5] Nishiyama H 1984 *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng. Ser. B* **50** 1658

[6] Nishiyama H, Nishiyama T 1984 *J. Fluids Eng.* **106** 312

[7] Efremov I I, Semenenko V N 1975 *Gidromekhanika* **31** 3

[8] Semenenko V N 1996 *International Journal of Fluid Mechanics Research* **23** 302

- [ 9 ] Semenenko V N 2004 *International Journal of Fluid Mechanics Research* **31** 621
- [ 10 ] Kunz R F ,Boger D A ,Stinebring D R ,Chyczewski T S ,Lindau J W , Gibeling H J ,Venkateswaran S ,Govindan T R 2000 *Comput. Fluids* **29** 849
- [ 11 ] Fu H P ,Lu C J ,Wu L 2005 *J. Hydrodynamics ,Ser. A* **20**(1) 84 ( in Chinese )[ 傅慧萍、鲁传敬、吴磊 2005 水动力学研究与进展 ,A 辑 **20**(1) 84 ]
- [ 12 ] Fu H P ,Lu C J ,Li J 2004 *J. Ship Mech.* **8**(3) 1 ( in Chinese ) [ 傅慧萍、鲁传敬、李杰 2004 船舶力学 **8**(3) :1 ]
- [ 13 ] Jia L P ,Wang C ,Wei Y J 2006 *J. Hydrodynamics ,Ser. B* **18**(3) 273
- [ 14 ] Jia L P ,Zhang J Z ,Yu K P ,Wang Q ,Wang H B 2006 *Ship Eng.* **28**(2) 20 ( in Chinese )[ 贾力平、张嘉钟、于开平、王聪、王海斌 2006 船舶工程 **28**(2) 20 ]
- [ 15 ] Travis K P ,Gubbins K E 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 1984
- [ 16 ] Gao X Y ,Zhao X P ,Zheng C Q 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 272 ( in Chinese )[ 高向阳、郑小鹏、赵常卿 1997 物理学报 **46** 272 ]
- [ 17 ] Wang C L ,Li Z X ,Li J Y ,Xiu P ,Hu J ,Fang H P 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2646
- [ 18 ] Zhang H ,Zhang B J ,Liang S Q ,Lu Y H 2001 *Chem. Phys. Lett.* **350** 247
- [ 19 ] Zhang H ,Zhang B J ,Lu J W ,Liang S Q 2002 *Chem. Phys. Lett.* **366** 24
- [ 20 ] Zhang H ,Zhang B J ,Zhang J J 2004 *Chem. Phys. Lett.* **397** 233
- [ 21 ] Gong B Z ,Zhang B J ,Qin X ,Zhang H 2007 *Chem. Phys.* **331** 207
- [ 22 ] Berendsen H J C ,Grigera J R ,Straatsma T P 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 6269
- [ 23 ] Stillinger F H ,Rahman A 1974 *J. Chem. Phys.* **60** 1545
- [ 24 ] Neumann M 1983 *Mol. Phys.* **50** 841
- [ 25 ] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 695
- [ 26 ] Todd B D ,Evans D J ,Daivis P J 1995 *Phys. Revi. E* **52** 1627
- [ 27 ] Pellone C ,Franc J P ,Perrin M 2004 *Comptes Rendus Mecanique* **332** 827

## Non-equilibrium molecular dynamics simulation for mechanism and drag reduction of underwater supercavitation in open system<sup>\*</sup>

Gong Bo-Zhi Zhang Bing-Jian<sup>†</sup>

( Department of Chemistry ,Zhejiang University ,Hangzhou 310027 ,China )

( Received 29 July 2008 ; revised manuscript received 14 August 2008 )

### Abstract

Non-equilibrium molecular dynamics was introduced for studying supercavitation mechanism and its drag reduction effect. Flow field details like local density distribution ,local cavity number distribution ,friction coefficient and gas volume percentage were calculated. The results showed that cavity number criterion is applicable in predicting supercavitation. Low cavity number area and actual cavity area are spatially separated. Velocity was the critical factor on cavity formation. Cavitator shape can affect gas volume percentage in cavity. Supercavitation can bring about 50%—90% skin friction reduction ,comparing with cloud cavitation. The results agree with previous numerical simulation ,showing the model is suitable for studying supercavitation mechanism in molecular scale and provides a valuable tool for investigating flow details.

**Keywords** : non-equilibrium molecular dynamics , supercavitation , high-velocity flow , friction coefficient

**PACC** : 0570 , 4755B , 4770

<sup>\*</sup> Project supported by the National Nature Science Foundation of China ( Grant Nos. 20671080 and 20473073 ).

<sup>†</sup> E-mail : zbj@mail.hz.zj.cn